# Poszukiwanie ekstremów funkcji

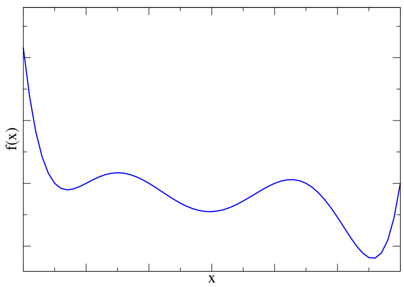
Janusz Szwabiński

May 29, 2003

1. Funkcje jednej zmiennej
   - metoda złotego podziału
   - interpolacja paraboliczna i metoda Brenta
   - poszukiwanie minimów z wykorzystaniem pierwszych pochodnych
2. Funkcje wielu zmiennych
   - metoda symplex
   - metoda Powella
   - metody oparte na gradientach
3. Minima globalne

---

Sformułowanie zagadnienia




---

Metoda złotego podziału (1)

Jeżeli dla $a < b < c$ zachodzi

$$f(b) < f(a)$$

oraz

$$f(b) < f(c)$$

$\Rightarrow$ funkcja $f(x)$ ma w przedziale $(a, c)$ minimum (o ile nie jest osobliwa)

$\Rightarrow$ potrzeba trzech punktów do zlokalizowania minimum

---

Metoda złotego podziału (2)

Wybieramy nowy punkt $x \in (b, c)$ (lub $x \in (a, b)$)

- $f(b) < f(x)$

$\Rightarrow$ minimum leży w przedziale $(a, x)$

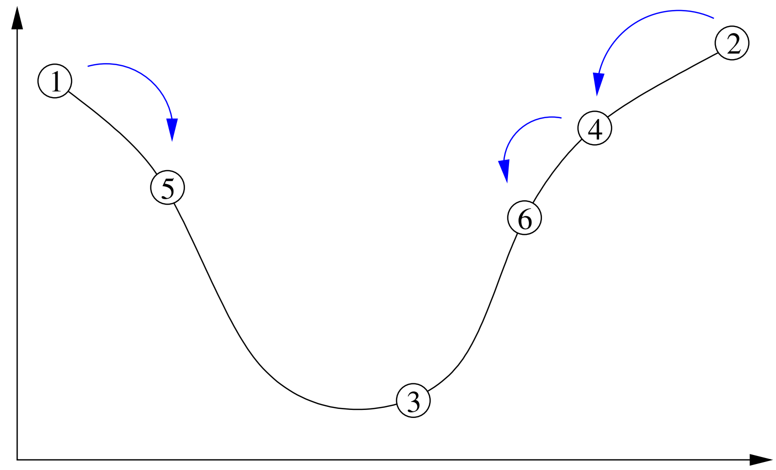
- $f(b) > f(x)$

  $\Rightarrow$ minimum leży w przedziale $(b, c)$

$\Rightarrow$ punkt środkowy trypletów $(a, b, x)$ lub $(b, x, c)$ jest najlepszym przybliżeniem minimum osiągniętym do tej pory

---

Metoda złotego podziału (3)




---

Metoda złotego podziału (4)

Załóżmy, że minimum leży w punkcie $b$ oraz, że udało nam się go zlokalizować w małym przedziale

$$(1-\epsilon)b < b < (1+\epsilon)b$$

gdzie $\epsilon$ to liczba rzędu jednostki maszynowej (np. $3 * 10^{-8}$ w pojedynczej precyzji)

W otoczeniu punktu $b$ funkcja dana jest wzorem

$$f(x) \simeq f(b) + \frac{1}{2} f''(b)(x-b)^2$$

Chcemy, aby w ostatnim równaniu drugi wyraz był rzędu $\epsilon f(b)$:

$$|x-b| < \sqrt{\epsilon}|b|\sqrt{\frac{2|f(b)|}{b^2 f''(b)}}$$

---

Metoda złotego podziału (5)

Dla większości funkcji wartość

$$\sqrt{\frac{2|f(b)|}{b^2 f''(b)}} \sim 1$$

Stąd

$$|x-b| < \sqrt{\epsilon} b$$

$\Rightarrow$ nie ma raczej sensu pytać o otoczenie minimum mniejsze niż $\sqrt{\epsilon} b$

---

Metoda złotego podziału (6)

Przypuśćmy, że $b$ jest ułamkiem $w$ odległości między $a$ i $c$, tzn.

$$\frac{b-a}{c-a} = w, \quad \frac{c-b}{c-a} = 1-w$$

Załóżmy ponadto, że

$$\frac{x-b}{c-a} = z$$

$\Rightarrow$ następny przedział, w którym znajduje się minimum, będzie miał długość $w+z$ albo $1-w$

Chcemy zminimalizować najgorszą możliwość:

$$z = 1 - 2w$$

---

Metoda złotego podziału (7)

Stąd wynika

$$|b-a| = |x-c|$$

$\Rightarrow$ $x$ będzie symetryczny do $b$ względem środka przedziału i będzie leżał w dłuższym z podprzedziałów

Jeżeli wybraliśmy $z$ optymalnym w bierzącym kroku, to w poprzednim zrobiliśmy to samo dla $w$

$\Rightarrow$ $x$ powinien być tym samym ułamkiem odległości między $b$ i $c$ (jeśli to jest większy podprzedział), co $b$ jest między $a$ i $c$

Stąd

$$\frac{z}{1-w} = w \quad \Rightarrow \quad w^2 - 3w + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad w = \frac{3-\sqrt{5}}{2} \approx 0,38197$$

---

Metoda złotego podziału (8)

$\Rightarrow$ punkt środkowy $b$ optymalnego przedziału $(a, b, c)$ zawierającego minimum leży w odległości ułamkowej $0,38197$ od jednego z końców i $0,61803$ od drugiego

$\Rightarrow$ liczba cyfr znaczących w wyniku rośnie liniowo z liczbą dodatkowych kroków

---

Interpolacja paraboliczna i metoda Brenta (1)

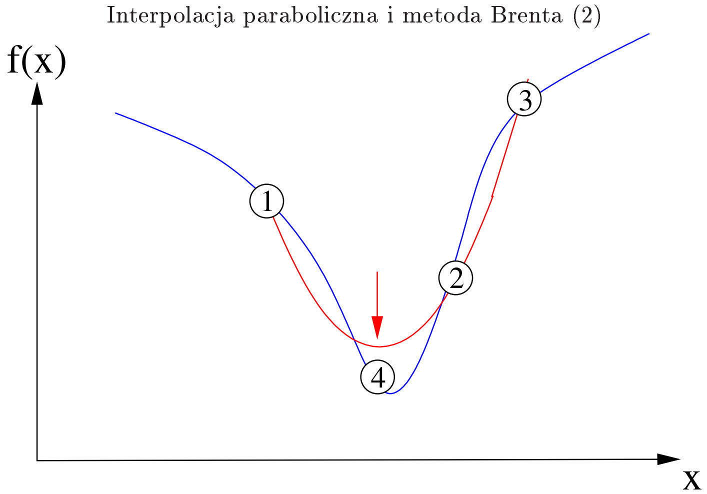
Funkcja wystarczająco gładka

$\Rightarrow$ w pobliżu minimum funkcja kwadratowa jest dobrym przybliżeniem

$\Rightarrow$ parabola dopasowana do dowolnych trzech punktów powinna doprowadzić nas w jednym kroku do minimum albo przynajmniej w jego bliskie otoczenie

---

Interpolacja paraboliczna i metoda Brenta (2)



### Interpolacja paraboliczna i metoda Brenta (3)

Minimum paraboli przechodzącej przez trzy dowolne (niewspółliniowe) punkty $a$, $b$ i $c$

$$x = b - \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2[f(b)-f(c)]-(b-c)^2[f(b)-f(a)]}{(b-a)[f(b)-f(c)]-(b-c)[f(b)-f(a)]}$$

Wada: wzór opisuje zarówno minimum jak i maksimum paraboli

$\Rightarrow$ w pobliże minimum dochodzimy innym algorytmem

### Interpolacja paraboliczna i metoda Brenta (4)

Metoda Brenta:

- w każdym kroku tej metody zapamiętujemy sześć punktów $a$, $b$, $u$, $v$, $w$ i $x$
  - minimum leży w przedziale $(a, b)$
  - $x$ to najlepsze do tej pory przybliżenie minimum
  - w punkcie $w$ funkcja ma drugą co do wartości najmniejszą wartość
  - $v$ - poprzednia wartość $w$
  - $u$ to punkt, w którym wartość funkcji była wyliczona ostatnio

### Interpolacja paraboliczna i metoda Brenta (4)

- interpolację kwadratową przeprowadzamy dla punktów $x$, $v$ i $w$
- wynik interpolacji zostaje zaakceptowany, jeśli:
  - parabola leży wewnątrz przedziału $(a, b)$
  - interpolacja pociąga za sobą przesunięcie od $x$ do nowego punktu, które jest mniejsze niż połowa takiego przesunięcia w poprzednim kroku.
- jeśli interpolacja będzie nie do przyjęcia, „włączamy" metodę złotego podziału

### Metody wykorzystujące pierwsze pochodne (1)

Teoretycznie możemy po prostu szukać pierwiastków pierwszej pochodnej, ignorując zupełnie informację zawartą w wartościach funkcji

Wady

- jak odróżnić maksima od minimów (bez wyliczania drugiej pochodnej)
- dokąd „pójść" z warunków początkowych, które pokazują spadek pochodnych w jednym (lub obu) punkcie zewnętrznym w kierunku wyprowadzającym po za przedział określoności funkcji

### Metody wykorzystujące pierwsze pochodne (2)

Inna możliwość

- jeżeli minimum znajduje się w przedziale $(a, b, c)$, obliczenie pochodnej w punkcie $b$ wskazuje jednoznacznie, czy punkt $x$ leży w $(a, b)$ czy w $(b, c)$
- wartości pochodnej w $b$ i w poprzednim punkcie $x$ są ekstrapolowane do zera metodą siecznych (odwrotna interpolacja liniowa)

### Metoda symplex (1)

**Definicja** Sympleks to figura geometryczna, składająca się w $N$ wymiarach z $N+1$ punktów (wierzchołków)

- trójkąt w dwóch wymiarach
- czworościan (niekoniecznie regularny) w trzech wymiarach
- traktując dowolny punkt niezdegenerowanego sympleksu jako początek, inne punkty definiują kierunki wektorów rozpinających $N$–wymiarową przestrzeń wektorową

---

Metoda symplex (2)

Wartości początkowe

- potrzebujemy $N+1$ punktów
- oznaczając jeden z nich przez $\vec{P}_0$, inne określamy ze wzoru

$$\vec{P}_i = \vec{P}_0 + \lambda \vec{e}_i$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| gdzie | $\vec{e}_i$ | - | wektor bazowy |
| | $\lambda$ | - | charakterystyczna skala problemu |

---

Metoda symplex (3)

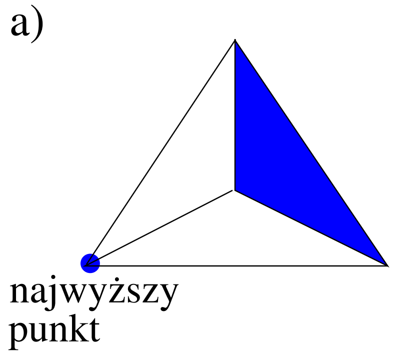
**Definicja** Najwyższym punktem sympleksu nazywamy wierzchołek, w którym wartość funkcji będzie największa. Analogicznie określamy punkt najniższy sympleksu

Deformacje sympleksu

- odbicia (z zachowaniem objętości)
- odbicie i rozciąganie
- kontrakcja

---

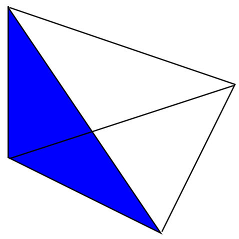
Metoda symplex (4)




---

Metoda symplex (5)

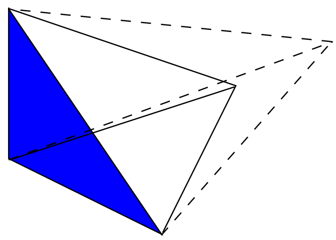
b)



---

Metoda symplex (6)

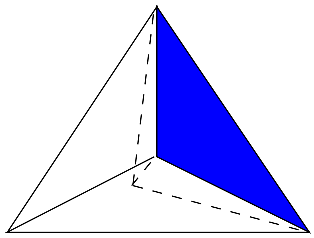
c)



---

Metoda symplex (7)

d)



⇒ sympleks porusza się w kierunku najbliższego minimum i zapada się w sobie po jego osiągnięciu

---

Metoda Powella (1)

Startujemy w punkcie $\vec{P}_0$ i przemieszczamy się w kierunku $\vec{n}$

⇒ minimum funkcji $f(\vec{P})$ wzdłuż $\vec{n}$ możemy znaleźć za pomocą metod dla funkcji jednej zmiennej

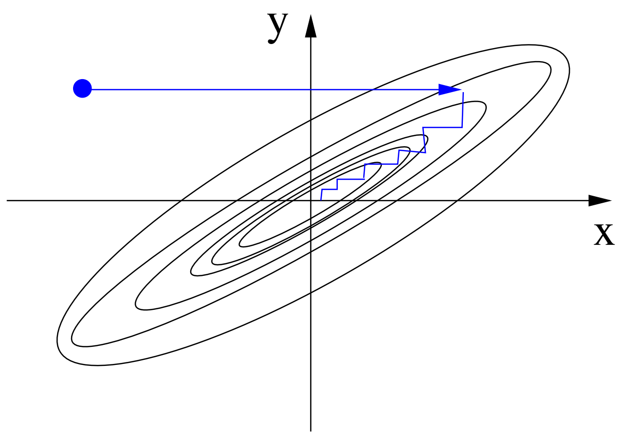
⇒ chcemy znaleźć minimum funkcji wielu zmiennych wykonując szereg jednowymiarowych minimalizacji

---

Metoda Powella (2)

Wektory jednostkowe $\vec{e}_1, \ldots, \vec{e}_N$ jako zbiór kierunków

- zadowalające dla pewnej klasy funkcji, ale...
- ...mało wydajne




Metoda Powella (3)

Przy wyborze zbioru kierunków powinniśmy zwrócić uwagę na dwie rzeczy:

- zbór powinien zawierać kilka, które szybko doprowadzą nas w pobliże minimum
- minimalizacja w jednym kierunku nie powinna psuć osiągniętej już minimalizacji w innym.

Metoda Powella (4)

Minimalizujemy funkcję wzdłuż $\vec{u}$

$\Rightarrow$ gradient funkcji w minimum (liniowym) musi być prostopadły do $\vec{u}$

Rozwijamy $f(\vec{x})$ w szereg względem początku układu $\vec{P}$

$$\begin{aligned} f(\vec{x}) &= f(\vec{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots \\ &\simeq c - \vec{b}\vec{x} + \frac{1}{2}\vec{x}\mathbf{A}\vec{x} \end{aligned}$$

$$c \equiv f(\vec{P}), \quad \vec{b} \equiv -\nabla f|_{\vec{P}}, \quad [\mathbf{A}]_{i,j} \equiv \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

Metoda Powella (5)

Gradient funkcji ma postać

$$\nabla f = \mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}$$

$\Rightarrow$ minimum występuje w punkcie będącym rozwiązaniem układu

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$$

Poruszając się w pewnym kierunku, spowodujemy zmianę gradientu

$$\delta(\nabla f) = \mathbf{A}(\delta\vec{x})$$

Metoda Powella (6)

Aby minimalizacja wzdłuż $\vec{v}$ nie zepsuła minimalizacji wzdłuż $\vec{u}$, gradient musi pozostać prostopadły do $\vec{u}$

$$0 = \vec{u}\delta(\nabla f) = \vec{u}\mathbf{A}\vec{v}$$

$\Rightarrow$ $\vec{u}$ i $\vec{v}$ są sprzężone

### Metoda Powella (7)

Inicjalizujemy zbiór kierunków $\vec{u}_i$ wektorami bazowymi

$$\vec{u}_i = \vec{e}_i, \quad i = 1, \ldots, N$$

Procedura bazowa:

- zapamiętaj pozycję wyjściową jako $\vec{P}_0$
- dla $i = 1, \ldots, N$, przesuń $\vec{P}_{i-1}$ do minimum wzdłuż kierunku $\vec{u}_i$ i oznacz ten punkt jako $\vec{P}_i$
- dla $i = 1, \ldots, N-1$ przyjmij $\vec{u}_i \leftarrow \vec{u}_{i+1}$
- przyjmij $\vec{u}_N \leftarrow \vec{P}_N - \vec{P}_0$
- przesuń $\vec{P}_N$ do minimum wzdłuż $\vec{u}_N$ i nazwij ten punkt $\vec{P}_0$

### Metoda Powella (8)

⇒ dla formy kwadratowej $k$ iteracji produkuje zbiór kierunków, którego $k$ ostatnich elementów jest wzajemnie ze sobą sprzężonych

⇒ $N$ iteracji procedury bazowej ($N(N+1)$ minimalizacji liniowych) powinno dokładnie zminimalizować formę kwadratową

Wada

- odrzucenie w każdym kroku $\vec{u}_1$ na rzecz $\vec{P}_N - \vec{P}_0$ zmierza do wytworzenia kierunków liniowo zależnych

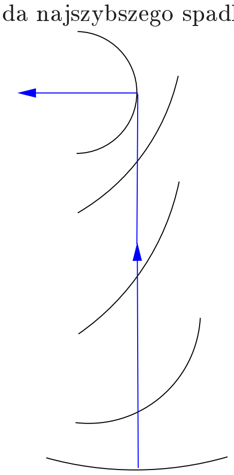
⇒ reinicjalizuj zbiór kierunków $\vec{u}_i$ po każdych $N$ lub $N+1$ iteracjach procedury bazowej

### Metoda najszybszego spadku (1)

- wybierz punkt początkowy $\vec{P}_0$
- przejdź od $\vec{P}_i$ do $\vec{P}_{i+1}$ minimalizując funkcję wzdłuż kierunku najszybszego spadku, tzn.

$$-\nabla f(\vec{P}_i)$$

### Metoda najszybszego spadku (2)



⇒ metoda wymusza skręty pod kątem prostym

$\Rightarrow$ mała wydajność (ale duża stabilność!)

---

Metoda gradientów sprzężonych (1)

Załóżmy ponownie, że naszą funkcję można przybliżyć formą

$$f(\vec{x}) \simeq c - \vec{b}\vec{x} + \frac{1}{2}\vec{x}\mathbf{A}\vec{x}$$

Startując od pewnego wektora $\vec{g}_0$, generujemy dwa ciągi wektorów,

$$\begin{aligned} \vec{g}_{i+1} &= \vec{g}_i - \lambda_i \mathbf{A}\vec{h}_i, \quad i = 0, 1, 2, \ldots \\ \vec{h}_{i+1} &= \vec{g}_{i+1} + \gamma_i \vec{h}_i, \quad \vec{h}_0 = \vec{g}_0 \end{aligned}$$

---

Metoda gradientów sprzężonych (2)

Chcemy, aby wektory spełniały warunki ortogonalności i sprzężenia

$$\begin{aligned} \vec{g}_i\vec{g}_j &= 0 \\ \vec{h}_i\mathbf{A}\vec{h}_j &= 0, \quad j < i \\ \vec{g}_i\vec{h}_j &= 0 \end{aligned}$$

Stąd wynika

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \frac{\vec{g}_i\vec{g}_i}{\vec{h}_i\mathbf{A}\vec{h}_i} = \frac{\vec{g}_i\vec{h}_i}{\vec{h}_i\mathbf{A}\vec{h}_i} \\ \gamma_i &= \frac{\vec{g}_{i+1}\vec{g}_{i+1}}{\vec{g}_i\vec{g}_i} \end{aligned}$$

---

Metoda gradientów sprzężonych (3)

**Twierdzenie 1** *Niech*

$$\vec{g}_i = -\nabla f(\vec{P}_i)$$

*dla pewnego punktu $\vec{P}_i$, w którym funkcja $f$ ma postać formy kwadratowej. Przypuśćmy dalej, że kontynuujemy poszukiwanie minimum w kierunku $\vec{h}_i$ oraz, że nowe minimum ulokowane jest w punkcie $\vec{P}_{i+1}$. Wówczas zachodzi*

$$\vec{g}_{i+1} = -\nabla f(\vec{P}_{i+1})$$

*przy czym $\vec{g}_{i+1}$ jest taki sam, jakby był skonstruowany za pomocą*

$$\vec{g}_{i+1} = \vec{g}_i - \lambda_i \mathbf{A}\vec{h}_i, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

---

Metoda gradientów sprzężonych (4)

**Dowód** Z równania

$$\nabla f = \mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}$$

wynika

$$\vec{g}_i = -\mathbf{A}\vec{P}_i + \vec{b}$$

a zatem

$$\vec{g}_{i+1} = -\mathbf{A}(\vec{P}_i + \lambda\vec{h}_i) + \vec{b} = \vec{g}_i - \lambda\mathbf{A}\vec{h}_i$$

z $\lambda$ dobranym tak, aby osiągnąć minimum liniowe. Ale w minimum tym zachodzi

$$\vec{h}_i\nabla f = -\vec{h}_i\vec{g}_{i+1} = 0$$

Metoda gradientów sprzężonych (5)

**Dowód** (ciąg dalszy)
Rozwiązując ostanie dwa równania względem $\lambda$, otrzymamy

$$\lambda_i = \frac{\vec{g}_i \vec{g}_i}{\vec{h}_i \mathbf{A} \vec{h}_i} = \frac{\vec{g}_i \vec{h}_i}{\vec{h}_i \mathbf{A} \vec{h}_i}$$

co kończy dowód ∎

---

Wyżarzanie symulowane (1)

Analogia z termodynamiką

- wolno schładzany system znajduje stan o minimalnej energii
- energia systemu w równowadze termicznej w temperaturze $T$ jest rozłożona pomiędzy różne stany energetyczne z rozkładem prawdopodobieństwa Boltzmanna

$$P(E) \sim \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

⇒ nawet w niskich temperaturach system może znajdować się w stanie o wysokiej energii

⇒ istnieje możliwość, że system „wyjdzie" z lokalnego minimum i znajdzie inne (lepsze)

---

Wyżarzanie symulowane (2)

Algorytm Metropolisa: symulowany system zmienia konfigurację z energii $E_1$ do $E_2$ z prawdopodobieństwem

$$p = \min\left[1, \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right)\right]$$

---

Wyżarzanie symulowane (3)

Niezbędne elementy (w systemach innych niż termodynamiczne)

- opis możliwych konfiguracji systemu
- generator losowych zmian w konfiguracji
- funkcja $E$ (odpowiednik energii), której minimum to cel obliczeń
- parametr $T$ (odpowiednik temperatury) oraz reguły, w jaki sposób parametr ten zmieniany jest od dużych do małych wartości.

---

Wyżarzanie symulowane (4)

Zagadnienie komiwojażera:

- odwiedzamy $N$ miast o pozycjach $(x_i, y_i)$, a następnie wracamy do miasta początkowego
- każde miasto ma być odwiedzone tylko raz
- trasa możliwie najkrótsza

Problem $NP$–zupełny

⇒ czas znalezienia dokładnego rozwiązania rośnie z $N$ jak

$$\exp[const \times N]$$

⇒ koszty obliczeniowe są bardzo duże

⇒ dużo minimów lokalnych

---

Wyżarzanie symulowane (5)

Cel praktyczny: znaleźć minimum, które nawet jeśli nie jest absolutne, nie może być już dużo bardziej poprawione

⇒ wyżarzanie pozwala znaleźć takie minimum z nakładem obliczeń $N^\gamma$, gdzie $\gamma$ to pewna mała liczba

---

Wyżarzanie symulowane (5)

1. *Konfiguracja*: miasta są ponumerowane indeksem $i = 1, \ldots, N$ i każde z nich ma współrzędne $(x_i, y_i)$. Konfiguracje to permutacje numerów miast
2. *Zmiany konfiguracji*:
   - część trasy usunięta i zastąpiona tymi samymi miastami w odwrotnej kolejności
   - część trasy usunięta i wstawiona między inne dwa miasta

---

Wyżarzanie symulowane (6)

3. „*Energia*” to po prostu długość całej trasy

$$E = L = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{(x_i - x_{i+1})^2 + (y_i - y_{i+1})^2}$$

4. Generujemy najpierw losowo różne konfiguracje i używamy ich do określenia zmian $\Delta E$, z którymi będziemy mieli do czynienia przy przejściu od kroku do kroku. Wybieramy początkowe $T$ dużo większe od największego $\Delta E$, a następnie zmniejszamy $T$ o maksymalnie 10% w każdym kroku. Utrzymujemy $T$ stałe dla $100N$ rekonfiguracji lub $10N$ udanych rekonfiguracji (w zależności od tego, co nastąpi wcześniej)

---

Wyżarzanie symulowane (7)

Minimum „zwykłej” funkcji $f(\vec{x})$

1. Konfiguracja to po prostu punkt $\vec{x}$
2. Zmiana konfiguracji to losowe przesunięcie od $\vec{x}$ do $\vec{x} + \delta\vec{x}$
3. Energia to wartość $f(\vec{x})$
4. Parametr kontrolny definiuje się podobnie, jak w przypadku minimalizacji kombinatoryjnej

---

Metody dyfuzyjne (1)

Wyobraźmy sobie metodę, której każdy krok polega na częściowym „zasypywaniu” minimów lokalnych

⇒ po pewnej liczbie kroków, powinna zostać jedynie reszta minimum globalnego

⇒ do jego znalezienia wystarczą metody lokalne

---

Metody dyfuzyjne (2)

Funkcję jednej zmiennej $f(x)$ poddajemy następującemu ciągowi transformacji:

$$\begin{aligned} f_0(x) & \\ f_1(x) &= f_0(x) + \Delta t \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} f_0(x) \\ &\vdots \\ f_{n+1}(x) &= f_n(x) + \Delta t \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} f_n(x) \end{aligned}$$

przy czym $\Delta t$ jest małą, dodatnią liczbą

---

Metody dyfuzyjne (3)

⇒ minima w każdym kroku będą „płytsze"

⇒ maksima będą niższe

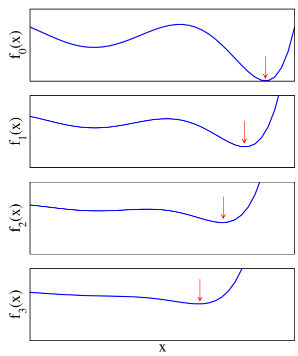
⇒ w punktach przegięcia funkcja pozostaje bez zmian

**Przykład** Rozważmy funkcję

$$f(x) = (x-3)(x-1.5)(x-1)(x+1)(x+2)(x+2,5)$$

---

Metody dyfuzyjne (4)




---

Metody dyfuzyjne (5)

Wady

- pozycja minimum w każdym kroku przesuwa się w porównaniu z położeniem oryginalnym
- konieczność wyliczania drugich pochodnych

Rozwiązanie (pierwszego problemu)

- obliczamy minimum funkcji $f_4(x)$ i traktując to jako wartość startową, szukamy minimum funkcji $f_3(x)$ itd.
- możliwe, jeżeli krok od $f_i$ do $f_{i+1}$ nie będzie zbyt duży

---

Metody dyfuzyjne (6)

Z równania

$$f_{n+1}(x) = f_n(x) + \Delta t \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} f_n(x)$$

wynika

$$\frac{f_{n+1}(x) - f_n(x)}{\Delta t} = \frac{\mathrm{d}^2 f_n(x)}{\mathrm{d}x^2}$$

W granicy $\Delta t \to 0$ otrzymamy

$$\frac{\mathrm{d} f_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}^2 f_n(x)}{\mathrm{d}x^2}$$

czyli jednorodne równanie dyfuzji ze stałą dyfuzji równą 1 oraz warunkiem początkowym

$$f(x, t = 0) = f_0(x)$$

---

Metody dyfuzyjne (7)

W $d$ wymiarach

$$\frac{\mathrm{d} f_n(\vec{x}, t)}{\mathrm{d}t} = \Delta_d f(\vec{x}, t)$$

Możliwe rozwiązanie tego równania ma postać

$$f(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\sqrt{\pi t})^d} \int \mathrm{d}^d x' f_0(\vec{x}') \exp\left[-\frac{|\vec{x} - \vec{x}'|^2}{4t}\right]$$

---